

# РОЛЬ РАССТОЯНИЯ МЕЖДУ МЕМБРАНАМИ КРИСТЫ МИТОХОНДРИИ В ДВИЖЕНИИ ЦИТОХРОМА C К САЙТУ СВЯЗЫВАНИЯ У III ДЫХАТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА

Абатурова А.М., Браже Н.А., Ризниченко Г.Ю., Коваленко И.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т,  
кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12,  
+7(495)9390289, abaturova@list.ru

Цитохром C (цитC) при окислительном фосфорилировании в митохондриях переносит электроны в межмембранном пространстве и кристах от III к IV дыхательному комплексу. Толщина люмена крист (ТЛК) может увеличиваться, что приводит к затруднению окислительного фосфорилирования [1].

С помощью программы броуновской динамики ProKSim [2] мы построили модель диффузии молекулы цитC в участке кристы, содержащем неподвижный димер III дыхательного комплекса ( $III_2$ ). Мембраны учитывались как геометрические ограничения. Были использованы PDB структуры комплекса  $III_2$  1BGY (с достроенной субъединицей E) и цитC 3O1Y. В модели значение pH равнялось 7, значение ионной силы было 130 mM, цитC был в окисленном состоянии, цитохром  $C_1$  (цитC<sub>1</sub>) субъединицы P  $III_2$  был в восстановленном.

Мы меняли ТЛК от 120 до 160 Å [1], величина реакционного объема оставалась постоянной, длина мембраны была 260-300 Å. Шаг по времени в модели - 100 пс. ЦитC диффундировал в течение 9 мкс, затем в течение 4.5 мкс записывались положения атома Fe цитC для 20000 случайных начальных положений молекулы и проводился анализ диффузии цитC. Положения Fe наносились на матрицу с шагом 3 Å. Были выбраны ячейки, суммарно в которых Fe цитC находится 0.31% общего времени и время пребывания цитC в этих ячейках больше  $63 \pm 4\%$  от максимального времени, проводимого в одной ячейке. Эти ячейки расположены вдоль поверхности III дыхательного комплекса на расстоянии 20-30 Å.

Численный эксперимент повторили 3 раза. Получено, что при увеличении расстояния между мембранами кристы с 120 до 160 Å вероятность нахождения цитC около субъединицы P в отобранных ячейках уменьшается с  $39.6 \pm 3.8\%$  до  $25.8 \pm 3\%$  и увеличивается у субъединицы D. Мы предполагаем, что цитC получает электрон от цитC<sub>1</sub> субъединицы P  $III_2$  [3]. Результат моделирования показывает затруднение диффузии цитC к нужному месту связывания для получения электрона. Добавление дыхательного комплекса IV в данную модель позволит изучить влияние изменения ТЛК на процесс транспорта электрона цитC между дыхательными комплексами.

Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0 при частичной поддержке РФФИ, проект № 19-04-00999.

## Литература

1. Siegmund S.E. et al., 2018, DOI: 10.1016/j.isci.2018.07.014
2. Хрущев С.С. и др., 2013, DOI: 10.20537/2076-7633-2013-5-1-47-64
3. Sousa J.S. et al., 2016, DOI: 10.7554/eLife.21290